



**INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA**  
**Área Departamental de Engenharia Química**

**ISEL**

## **Síntese de Complexos de Ferro (II) e Ruténio (II) com Potenciais Aplicações como Condutores Moleculares**

**Susana Margarida Pereira Soares**

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química

### **Resumo:**

De sua definição, um condutor molecular é “ uma molécula dimensional” que permite a troca de um electrão entre as extremidades através de uma ponte, sendo elas mesmas capazes de trocar electrões com o exterior.

Os condutores moleculares envolvendo centros metálicos podem ser constituídos por um sistema orgânico deslocalizado que estabelece a ponte entre os centros metálicos terminais, sendo ambas as partes responsáveis pelo desempenho final do condutor molecular. Os espaçadores orgânicos são responsáveis pelas propriedades electrónicas e pelo comprimento do condutor, enquanto que os centros metálicos, ao introduzirem electrões no sistema, aumentam a condutividade.

No capítulo 1 faz-se uma breve introdução aos condutores moleculares, como podem ser avaliados segundo a sua estrutura. Outro assunto abordado é a influência de compostos, mostrando deste modo a interferência do tipo de espaçadores utilizados. Faz-se ainda uma breve apresentação sobre os compostos homo e heterobimetálicos. Finalmente, apresenta-se uma pequena revisão sobre os compostos organometálicos  $\sigma$ -metálicos.

No capítulo 2 apresenta-se a síntese e caracterização dos compostos orgânicos, nomeadamente  $p$ -NECC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CCSiMe<sub>3</sub>,  $p$ -NECC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CCH e  $p$ -HC≡CC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CCH.

No capítulo 3 descreve-se a síntese de diversos complexos monometálicos de Ferro (II) e ruténio (II) com os ligandos acima referidos e diferentes fragmentos metálicos [FeCp(CO)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, [FeCp(dppe)]<sup>+</sup>, [RuCp(dppe)]<sup>+</sup> e [RuCp(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>.

Os complexos obtidos foram caracterizados utilizando as técnicas espectroscópicas usuais: RMN, IV, UV-vis. A eficiência da interacção electrónica entre os centros, ao longo do sistema  $\pi$ , foi avaliada por estudos electroquímicos (voltametria cíclica).

No capítulo 4 encontram-se descritas as diversas tentativas de síntese dos compostos homo e heterobimetálicos. Os ligandos e fragmentos utilizados foram os mesmos que no capítulo anterior.

O capítulo 5 descreve os pormenores experimentais da síntese e a caracterização espectroscópica dos compostos apresentados nos capítulos anteriores, bem como as condições gerais em que foram obtidos.

**Palavras-Chave** – Condutores moleculares, Ferro (II), Ruténio (II), Síntese, Caracterização,  $\eta$ 5-monociclopentadienilo.

**Dezembro de 2008**